Una aplicación poco frecuente: teorema del valor medio para integrales aplicado a ingeniería química

Mauricio González

Resumen: Es común encontrar múltiples aplicaciones de matemáticas en diferentes disciplinas. La idea de este trabajo es exponer un ejemplo de la utilización de un teorema que no se centra en calcular, y es poco frecuente encontrar aplicaciones de dicho teorema fuera de un contexto puramente matemático: el teorema del valor medio para integrales de funciones de una variable. Primero se hará una descripción del contexto de la materia en la cual se encuentra el problema en cuestión, se describirán someramente las bases químicas del problema para que sea posible explicar con detalles el contexto en que se utiliza matemáticas para los diferentes cálculos y después de esta introducción no matemática, se desarrollará el uso del teorema del valor medio.

Palabras clave: teorema del valor medio, aplicación a la química.

Abstract: It is common to find a lot of mathematics applications in different subjects. The main idea of this work is to expose an example of the use of a theorem that is not aimed at calculating, and it is unusual to find applications of this theorem outside a mathematics context: the mean value theorem for one variable function integrals. This works first explains the context of the subject in which the problem is found, it describes the chemical basic knowledge of the problem to explain in details the context where it uses mathematics in calculation and, after this introduction, it develops how to use the mean value theorem.

Keywords: mean value theorem, application in chemistry.

INTRODUCCIÓN

Cuando se enseña matemáticas de nivel universitario en una facultad como la de química, por ejemplo, donde el eje central de la carrera es justamente la química y no matemáticas, a veces se hace necesario enseñarle al estudiante, en los cursos

Fecha de recepción: 25 de mayo de 2004.

de matemáticas, algún tipo de aplicación directa del tema que se está desarrollando a ejemplos concretos que encontrará a lo largo de su carrera. Aunque pueda costarle trabajo entender, en un curso de matemáticas, el alcance del ejemplo o aplicación concreta dentro de un contexto puramente químico, las aplicaciones incentivan al estudiante, pues le dan una visión de lo que va a enfrentar en años posteriores en los diferentes cursos.

Es común en química, sobre todo en ingeniería química, encontrar múltiples aplicaciones de matemáticas. Por ejemplo, un tema básico son las ecuaciones diferenciales; basta considerar que cualquier reacción química involucra una velocidad de reacción y toda velocidad de reacción se puede expresar como una ecuación diferencial, para entender y apreciar la importancia que tiene este tema en cualquier disciplina relacionada con la química. Las ecuaciones de transferencia (como la transferencia de calor) son importantes en ingeniería química y son ejemplos clásicos de derivadas parciales en cursos de ecuaciones diferenciales.

En ecuaciones diferenciales, por tanto, es fácil encontrar infinidad de ejemplos para que los estudiantes de química puedan ver las aplicaciones de este tema concreto a lo largo de su carrera y apliquen así los conocimientos impartidos en un curso de matemáticas. Esto también es posible con otros temas como diferenciabilidad, función implícita, integrales, etc. Aun cuando la gran mayoría de estas aplicaciones se limitan, por ejemplo, a calcular una integral, resolver una ecuación diferencial o aplicar la regla de la cadena para calcular una derivada parcial, en definitiva se centran en el mero cálculo, pero no por ello dejan de ser importantes.

Tratar de buscar alguna aplicación o ejemplo concreto de los temas impartidos durante un curso de matemáticas no siempre es posible para todos los puntos desarrollados en un programa (y quizás tampoco sea siempre deseable), sobre todo con aquellos puntos del programa donde se manejan conceptos más abstractos de un tema específico. A veces es muy difícil explicarle al estudiante la importancia que puede tener tal o cual teorema o tan sólo darle un contexto netamente aplicado, ya que su utilidad no necesariamente es una aplicación directa en un problema químico.

La idea de este trabajo es exponer un ejemplo, que aparece en química, de la aplicación de un teorema que no se centra en calcular y cuyas aplicaciones no son frecuentes fuera de un contexto puramente matemático: una aplicación concreta del teorema del valor medio para integrales de funciones de una variable. La utilidad de los diferentes teoremas de valor medio es más que obvia para quienes estamos vinculados con la matemática, pero muchas veces es difícil hacer entender al estudiante la importancia de tales teoremas, que permiten demostrar la existencia de un valor o parámetro sin determinarlo concretamente, y hacerle ver la necesidad de entender los conceptos matemáticos que se enseñan. Con este ejemplo, se puede mostrar al estudiante que la aplicación de las matemáticas no reside pura y exclusivamente en el cálculo, y es tarea del docente motivar al estudiante, mostrándole la utilidad de los conceptos matemáticos en su carrera. Puesto que las matemáticas constituyen una herramienta en la química, hay que hacerle ver al estudiante que los conceptos matemáticos bien entendidos le permiten comprender mejor los problemas químicos, y hay que reforzar esta idea cada vez que se utilicen las matemáticas para resolver tales problemas.

En este trabajo, en particular, se desarrollará un ejemplo donde para solucionar cierto problema químico es necesaria la utilización del teorema de valor medio para integrales de funciones de una variable. En la bibliografía específica para este ejemplo (Aris, 1969, pp. 272-273; Levenspiel, 1990, pp. 159-162), dado que son libros centrados en química, no se explica el fundamento matemático involucrado para obtener estos resultados (es decir, no se menciona el teorema del valor medio), ni algunas de las interpretaciones que se hacen, tan sólo se explica el problema químico y el resultado al que se llega en dicho caso. Primero se hará una descripción del contexto de la materia en la cual se encuentra el problema en cuestión y se describirán someramente las bases químicas del problema para que sea posible explicar con detalles el contexto en que se utilizan las matemáticas para los diferentes cálculos. Después de esta introducción no matemática, se desarrollará el uso del teorema del valor medio para un caso particular, se mostrará su importancia y cómo sin este teorema hay cosas que no se podrían explicar satisfactoriamente.

DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA POR RESOLVER

El problema aparece en la materia que es eje central de ingeniería química, a saber, diseño de reactores. En esta materia, como su nombre lo dice, el objetivo es el diseño de los diferentes reactores químicos que se utilizan en la industria, y en un caso específico de reactor es donde podemos encontrar este ejemplo.

Sea un producto P que se quiere obtener mediante una reacción química a partir de una materia prima A, el objetivo del diseño de reactores es el diseño o selección de un reactor químico óptimo para ese proceso químico particular.

Parte importante en el diseño de dichos reactores es el cálculo de su volumen V y, para tal fin, en ciertos casos se utilizan integrales de funciones de una variable.

A continuación, se describirán brevemente los conceptos químicos necesarios para la comprensión del problema y luego se abordará de lleno el uso del teorema para establecer la relación entre los diferentes reactores.

CONTEXTO DEL PROBLEMA

Para poder explicar el contexto químico del problema, primero se darán algunas definiciones necesarias para la comprensión del problema en sí y se introducirán después los conceptos matemáticos utilizados.

Sea P el producto por obtener a través de una reacción química a partir de la materia prima A. Se denomina $(-r_A)$ a la velocidad de reacción con respecto al componente A, en donde el subíndice A indica que dicha velocidad se refiere a ese componente en particular. La elección de cuál componente usar para el diseño depende de cada caso, pero no se descarta que en la reacción puedan estar involucradas otras materias primas.[1] El signo menos en la velocidad de reacción expresa que $(-r_A)$ es la velocidad de desaparición del reactivo, o sea, que la concentración de A disminuye. En la velocidad de reacción están involucradas todas las reacciones químicas que pudieran aparecer en el proceso, tanto la reacción principal con la que obtenemos el producto deseado como las secundarias si las hubiere.

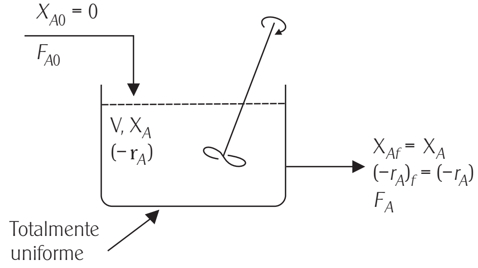
Dado un reactor cualquiera, sea F_{Ao} la cantidad de materia prima que ingresa al reactor y F_A la cantidad de materia prima que no reaccionó en el reactor y que por tanto sale de éste.[2] Ambas corrientes están entrando y saliendo continuamente del reactor con un flujo constante (véase la figura 1).

Se define la *conversión fraccional* como $X_A = \dfrac{F_{Ao} - F_A}{F_{Ao}}$ que representa la fracción de materia prima que es convertida en producto en el reactor. Es común tomar la conversión fraccional como la variable independiente y no la concentración de A, ya que X_A es una variable adimensional. La importancia de que la variable sea adimensional es independizar dicha variable de la manera como

[1] Usualmente la elección está relacionada con los costos de las diferentes materias primas utilizadas en el proceso.

[2] Por motivos económicos nunca se llega a completar la reacción a escala industrial, por eso nunca $F_A = 0$.

Figura 1 Reactor químico



se tenga expresada la concentración de A (moles, moles/litro, kilos/hora, etc.). Por consiguiente, la velocidad de reacción será una función de la conversión fraccional: $(-r_A) = (-r_A(X_A))$.

Se presentan a continuación los dos reactores básicos para el diseño de reactores con la correspondiente ecuación de diseño (en ambos casos dicha ecuación surge de plantear un balance de masa y se demuestran en el apéndice).

Reactor de mezcla completa

Es un tanque agitado cuya composición en cada instante es la misma en cada punto del reactor y, por tanto, es igual a la composición de salida (véase la figura 2).

Ecuación de diseño: $\dfrac{V}{F_{Ao}} = \dfrac{X_A}{-r_A(X_A)}$ (véase el apéndice), donde V es el volumen del reactor que se desea hallar para el diseño.

Figura 2 Reactor de mezcla completa

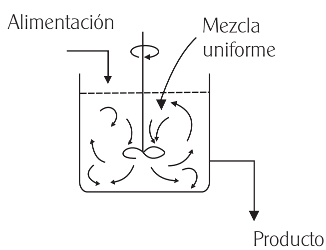
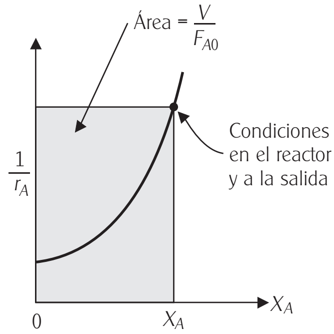


Figura 3 Representación gráfica del factor de diseño $\frac{V}{F_{Ao}}$ en un reactor de mezcla completa



Si se grafica $(1/(-r_A))$ en función de la variable X_A, el valor $\frac{V}{F_{Ao}}$ representa el área de rectángulo de base X_A y altura $\frac{1}{-r_A(X_A)}$ (véase la figura 3).

Reactor tubular flujo pistón

Un reactor tubular flujo pistón es un tubo donde el flujo del fluido avanza de manera ordenada a lo largo de la dirección del flujo, o sea, que los elementos del fluido avanzan en planos perpendiculares al flujo sin que exista mezcla en la dirección del flujo.[3] La condición necesaria y suficiente para que exista un flujo pistón en un reactor es que el tiempo de residencia en el reactor sea el mismo para cada elemento del fluido (véase la figura 4).

Ecuación de diseño: $\frac{V}{F_{Ao}} = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A(X_A)}$ (véase el apéndice), en donde V es el volumen del reactor (véase la figura 5).

En este caso el valor $\frac{V}{F_{Ao}}$ representa el área bajo la curva.

A continuación, describiremos cómo utilizar el teorema del valor medio en la interpretación de un caso particular de reactor y también para describir la transición entre otros dos tipos de reactores.

[3] Se supone que el diámetro del reactor tubular flujo pistón es mucho mayor que el diámetro de la cañería; de este modo, es razonable suponer que no ocurra reacción en la cañería.

Figura 4 Reactor tubular flujo pistón

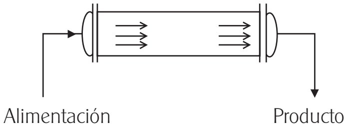
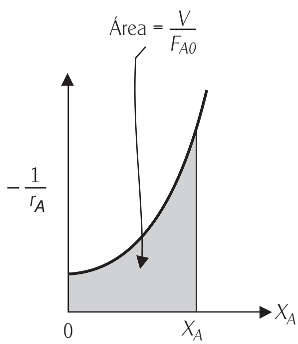


Figura 5 Representación gráfica del factor de diseño $\frac{V}{F_{Ao}}$ en un reactor flujo pistón



APLICACIÓN DEL TEOREMA DEL VALOR MEDIO

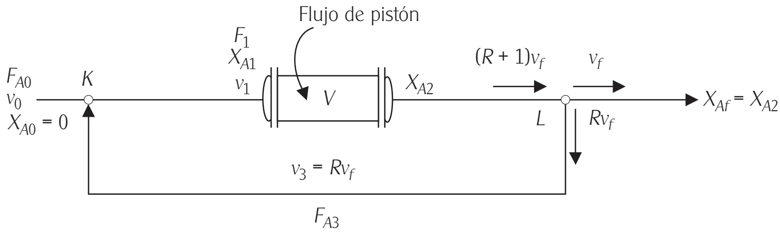
Se analiza ahora un tercer tipo de reactor químico como el que se muestra en la figura 6, que se llama reactor con recirculación.

Este tipo de reactores se utiliza cuando se obtienen bajos valores en la conversión o cuando la materia prima es muy cara, para poder aumentar la conversión a valores económicamente rentables. La idea de un reactor con recirculación es hacer retornar a una fracción de la corriente de salida de un rector flujo pistón a la entrada del mismo reactor. De esta manera, se logra que parte de la materia prima que no ha reaccionado y que se iría en la corriente de salida, al ingresar otra vez al reactor, pueda reaccionar.

Se define la relación de recirculación R de la siguiente manera:

$$R = \frac{\text{caudal de fluido que retorna a la entrada del reactor}}{\text{caudal que sale del sistema}}$$

Figura 6 Nomenclatura empleada en un reactor con recirculación



Para el caso de la figura 6, la relación de recirculación R resulta: $R = \dfrac{v_3}{v_f}$, donde v_3 y v_f representan el caudal que retorna a la entrada del reactor y el caudal que sale de él, respectivamente.

En este caso la ecuación de diseño queda: $\dfrac{V}{F_{Ao}} = (R+1)\displaystyle\int_{\frac{R}{R+1}X_{Af}}^{X_{Af}} \dfrac{dX_A}{-r_A(X_A)}$ (véase el apéndice).

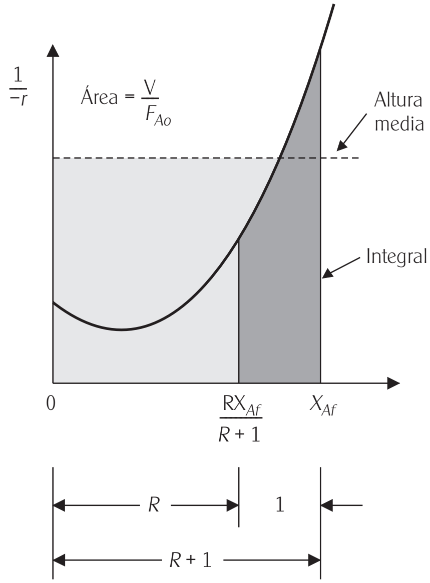
En este caso particular, en la ecuación de diseño, a diferencia del reactor tubular flujo pistón, el extremo inferior de integración no es cero. Esto se debe a que, al recircular, parte de la materia prima ya reaccionó y, por tanto, existe una cierta conversión al ingreso del reactor.

Para poder interpretar gráficamente este caso, se considera primero el intervalo $[0, X_A]$ que es el intervalo de variación de la conversión fraccional y se divide dicho intervalo en dos subintervalos, tomando como punto de división $X_A = \dfrac{R}{R+1} = X_{Af}$. En el intervalo $\left[\dfrac{R}{R+1} = X_{Af}, X_{Af}\right]$ que es el intervalo que aparece en la integral en ecuación de diseño, el valor de la integral corresponde al área bajo la curva, que por el teorema del valor medio es igual al área de un rectángulo.

Tomando la ecuación de diseño y separando términos obtenemos:

$$\int_{\frac{R}{R+1}X_{Af}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A(X_A)} + R\int_{\frac{R}{R+1}X_{Af}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A(X_A)}$$

Figura 7 Representación gráfica del factor de diseño $\frac{V}{F_{Ao}}$ en un reactor con recirculación



Si utilizamos el teorema del valor medio en la primera integral, la integral puede interpretarse como el área de un rectángulo cuya base es $X_{Af} - \frac{R}{R+1}X_{Af} = \frac{1}{R+1}X_{Af}$ y una cierta altura que está determinada a partir de dicho teorema. Entonces el valor de la segunda integral $R\int_{\frac{R}{R+1}X_{Af}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A(X_A)}$ corresponde al área de un rectángulo de la misma altura pero de base $R\frac{1}{R+1}X_{Af}$, ya que las áreas difieren en un factor R (véase la figura 7).

Ahora la longitud de la base de ese rectángulo de área $R\int_{\frac{R}{R+1}X_{Af}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-rA(X_A)}$ es la misma que la del intervalo $\left[0, R\frac{1}{R+1}X_{Af}\right]$. Por consiguiente, uniendo los rectángulos que tienen la misma altura, podemos interpretar que el valor $\frac{V}{F_{Ao}}$ =

$(R+1)\int_{\frac{R}{R+1}X_{Af}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A(X_A)}$ corresponde al área de un rectángulo de base X_{Af} y de altura determinada por el teorema del valor medio para la integral $\int_{\frac{R}{R+1}X_{Af}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A(X_A)}$.

En la figura 7, está representado el valor de dicha área.

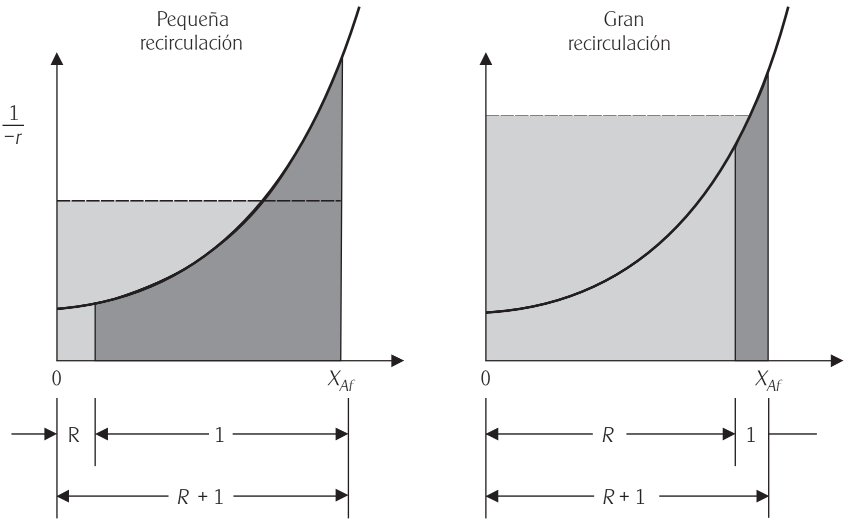
Como podemos ver, intentar interpretar gráficamente el factor de diseño $\frac{V}{F_{Ao}}$, como el área del rectángulo representado en la figura, no sería posible sin conocer el teorema del valor medio y su interpretación gráfica. Además, si tenemos en cuenta que en el área indicada no aparecen los mismos intervalos que aparecen en la ecuación de diseño y que existe un valor que no es posible determinar (la altura de éste), puede resultar confuso entender dicha área como el factor de diseño para cualquier estudiante que no conozca los fundamentos matemáticos aplicados.

Ahora que se está en condiciones de interpretar el caso del reactor con recirculación, si se compara gráficamente este caso con los reactores básicos de mezcla completa y flujo pistón, se puede ver que este reactor es un caso intermedio entre ambos. Para un caso fijo de una función creciente, y un valor de F_{Ao} constante, el volumen máximo corresponde al reactor de mezcla completa que es el área del rectángulo de base X_A. Para el mismo caso el volumen mínimo corresponde al área bajo la curva que calculamos con la integral en el caso del reactor tubular flujo pistón. Por consiguiente, en el caso de un reactor con recirculación, su volumen, queda comprendido entre el volumen máximo (reactor de mezcla completa) y el volumen mínimo (reactor flujo pistón).

Ahora, si se estudia qué ocurre cuando varía R, la relación de recirculación, intuitivamente podemos representarla utilizando la interpretación gráfica vista anteriormente. En la figura 8 se representan dos casos: uno con una pequeña recirculación y otra con gran recirculación.

Analizando la figura 8 se puede concluir que, para valores de recirculación pequeños, el valor del área se aproxima al caso de un reactor tubular flujo pistón (área bajo la curva). En particular, si se toma el valor de $R = 0$, ambas ecuaciones de diseño coinciden. Para grandes recirculaciones, el valor del área se aproxima al caso de un reactor mezcla completa (área del rectángulo de base X_{Af}). Para ver qué ocurre cuando $R \to +\infty$ se debe utilizar nuevamente el teorema del valor medio, pero esta vez para calcular un límite.

Figura 8 Las recirculaciones extremas se aproximan al flujo pistón ($R \to 0$) y a mezcla completa ($R \to \infty$)



$$\lim_{R\to+\infty}(R+1)\int_{\frac{R}{R+1}X_{Af}}^{X_{Af}}\frac{dX_A}{-r_A(X_A)}=\lim_{R\to+\infty}(R+1)\frac{1}{-r_A(c)}\left[X_{Af}-\frac{R}{R+1}X_{Af}\right]$$

$$\lim_{R\to+\infty}\frac{X_{Af}}{-r_A(c)}=\frac{X_{Af}}{-r_A(X_{Af})}$$

ya que $c \to X_{Af}$ cuando $R \to +\infty$, que es la ecuación para el caso de un reactor de mezcla completa.

CONSIDERACIONES FINALES

Aunque en este trabajo está bastante elaborada toda la introducción para poder explicar el contexto químico en el cual aparece esta aplicación, en el desarrollo de una clase habitual el énfasis se pone en la utilización del teorema, más que en explicar la parte química del cálculo. La idea fundamental de esta aplicación es poder motivar al estudiante, mostrándole algunos ejemplos químicos que posiblemente encuentre en su carrera, en los que los conceptos matemáticos son fundamentales para la comprensión total de dichos ejemplos. Con este tipo de aplicaciones matemáticas, se puede reafirmar la idea fundamental de que en matemáticas no todo consiste en calcular. Esta creencia suele estar muy arraigada sobre todo en los estudiantes que recién ingresan en la Facultad de Química, donde naturalmente muchas veces tienen otras expectativas con respecto a los cursos iniciales, y un curso de matemáticas al inicio de la carrera es lo que menos esperan. A menudo se hace difícil poner al estudiante dentro de contexto, sobre todo, en la parte conceptual.

Este tipo de problema es muy útil para hacer énfasis en que si los conceptos matemáticos están claros y entendidos, cuando dichos conceptos aparezcan en algún problema químico, el estudiante sólo debe interpretar químicamente los conceptos matemáticos que se le puedan sumar a los diferentes problemas en las materias específicas a lo largo de su carrera.

Todas las figuras que aparecen en este trabajo fueron modificaciones de figuras que aparecen en O. Levenspiel.

APÉNDICE

En este apéndice se fundamentarán las diferentes ecuaciones de diseño en los distintos reactores. Para obtener dichas ecuaciones se realiza un balance de masa de un determinado volumen de control. Este volumen se elige arbitrariamente dependiendo de cada reactor en particular. El balance de masa general lo podemos expresar de la siguiente manera:

$$E = S + R + P$$

En donde:

E = la materia que entra al volumen de control
S = la materia que sale del volumen de control
R = la materia que desapareció por reacción o se formó por reacción dentro del volumen de control
P = la materia que se acumuló dentro del volumen de control

Reactor de mezcla completa

En el caso de reactor de mezcla completa, la composición dentro del reactor es uniforme, por lo que es posible tomar el volumen de control como el de todo el reactor, entonces:

E (moles/tiempo) = F_{Ao}
S (moles/tiempo) = $F_A = F_{Ao}(1 - X_A)$
R (moles/tiempo) = $(-r_A)V$ = (moles/tiempo/volumen)(volumen)
$P = 0$

Sustituyendo en la ecuación de balance obtenemos:

$$F_{Ao} = F_{Ao}(1 - X_A) + (-r_A)\,V \Rightarrow \frac{V}{F_{Ao}} = \frac{X_A}{-r_A(X_A)}$$

Reactor de flujo pistón

En un reactor de flujo pistón la composición varía a lo largo del reactor, en particular, varía en la misma dirección que la del flujo, ya que por definición no hay mezcla en la dirección del flujo. En este caso el volumen de control se realizará en "un elemento diferencial de volumen" dV, un disco de sección igual a la del reactor.

E (moles/tiempo) = F_A
S (moles/tiempo) = $F_A + \mathrm{d}F_A$
R (moles/tiempo) = $(-r_A)\mathrm{d}V$ = (moles/tiempo/volumen)(volumen)
$P = 0$

En este caso, F_A depende de la posición en que se encuentre el volumen de control y dF_A representa el cambio el dicha magnitud en la salida del volumen de control. Sustituyendo en la ecuación de balance obtenemos:

$$F_A = F_A + \mathrm{d}F_A + (-r_A)\,\mathrm{d}V$$

$dF_A = d[F_{Ao}(1 - X_A)] = -F_{Ao}dX_A$, ya que X_A depende también de la posición en el reactor del elemento de volumen correspondiente.

Por lo tanto:

$F_{Ao}dX_A = (-r_A)dV$ integrando a lo largo del reactor se obtiene la ecuación de diseño siguiente:

$$\frac{V}{F_{Ao}} = \int_{X_{Ai}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A(X_A)}$$

en donde X_{Af} y X_{Ai} corresponden a la conversión fraccional a la salida y a la entrada del reactor respectivamente. $X_{Ai} = 0$ en el caso que discutimos previamente.

Reactor tubular con reciclo

En este caso, el reactor utilizado es un reactor tubular flujo pistón pero con otras condiciones en su entrada, ya que antes de ingresar al reactor existe una mezcla previa con parte del flujo de salida, por lo que, en este caso, en la ecuación de diseño van a variar los términos F_{Ao} y X_{Ai}.

Para este caso, se cumple que $F'_{Ao} = (R + 1)F_{A0}$, donde F_{Ao} corresponde al caudal de alimentación del sistema y F'_{Ao} corresponde al caudal de alimentación del reactor. También se cumple que $X_{Ai} = \frac{R}{R+1} = X_{Af}$. Sustituyendo ambos términos en la ecuación de diseño, obtenemos la ecuación correspondiente al reactor con recirculación:

$$\frac{V}{F_{Ao}} = (R+1)\int_{\frac{R}{R+1}X_{Af}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A(X_A)}$$

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Apóstol, T. (1975), *Calculus,* 2a. ed., España, Reverté.
Aris, R. (1969), *Elementary Chemical Reactor Analysis,* Estados Unidos, Prentice Hall.
Levenspiel, O. (1990), *Ingeniería de las reacciones Químicas,* España, Reverté.
Spivak, M. (1993), *Calculus,* 2a. ed., México, Reverté.
Stewart, J. (1999), *Cálculo,* 3a. ed., México, International Thompson Editores.

DATOS DEL AUTOR

Mauricio González
Cátedra de Matemáticas, Facultad de Química, UDELAR, Montevideo, Uruguay
mgonzale@fq.edu.uy